

## xTAPP Developers Meeting 2014 開催のお知らせ

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理電子状態計算ライブラリ xTAPP は、2013年4月に GPL ライセンス(ver.3)によって公開され、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps にも掲載されてユーザ数を増やしつつあります。今後は xTAPP の出力を利用したポストプロセス等、周辺プログラムの開発・公開も加速されることが期待されます。そこで xTAPP 本体や周辺プログラムの開発をより効果的・効率的に進めるため、情報交換の場として本ミーティングを企画しました。プログラム開発者ならびにユーザの皆さまのご参加をお待ちしております。

日時： 2014年8月27日(水) 13:00-17:00

(会議終了後、意見交換会を兼ねた懇親会(ワインパーティー)を開催します。)

場所： 東京大学(本郷キャンパス)理学部4号館3階1320号室

主催： TAPP コンソーシアム、新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」 A02-5 班

共催： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

世話人： 常行真司(東大)、山内 淳(慶応大)

参加申し込み方法：

参加者のお名前、所属、メールアドレス、懇親会の出欠 を添えて、8月20日(水)までに、下記あてにメールでお申し込みください。(懇親会の会費は有給者5,000円程度を予定しています。学生には割引があります。)

[xtapp\\_meeting@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:xtapp_meeting@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp)

### プログラム

13:00-14:00 吉本芳英(東大)： 開発者のための xTAPP 入門 (60min)

14:00-14:20 吉澤加奈子(東大)： xTAPP の GUI (コード名"TAPIOCA") (20min)

14:20-14:50 中村和磨(九工大)： TAPP-GW コード開発の進捗 (30min)

(14:50-15:10 Break)

15:10-15:40 河村光晶(東大)： 応答関数計算にも使える改良テトラヘドロン法 (30min)

15:40-16:10 山内 淳(慶応大)： xTAPP による格子欠陥系の XPS 計算 (30min)

16:10-16:40 只野央将(東大)： フォノンと熱伝導率計算 (コード名"ALAMODE") (30min)

16:40-17:00 山本良幸(東大)： TC 法、拡散量子モンテカルロ法への接続 (20min)

17:30-19:30 懇親会(ワインパーティー)